

Numerieke modellen als wetenschappelijke instrumenten

Prof. Dr. ir. Berlamont J., Katholieke Universiteit Leuven

Inleiding

Zijn numerieke modellen bruikbaar als wetenschappelijke instrumenten, m.a.w. kunnen ze gebruikt worden om nieuwe kennis te genereren?

Vooraleer op die vraag te kunnen antwoorden moeten we het eerst eens zijn over de definitie van een “numeriek model”. Volgens H. de Vriend is een model “een hanteerbare, begrijpelijke, schematische afbeelding van een stukje werkelijkheid” (intreerede T U Twente). Zulk model kan een “fysisch model” zijn of een “wiskundig model”. In het laatste geval bestaat het uit een aantal wiskundige (differentiaal) vergelijkingen die de fysische werkelijkheid beschrijven. Een “numeriek model” is een computerprogramma dat dit stelsel vergelijkingen oplost voor opgegeven geometrie, begin- en randvoorwaarden. Om tot die oplossing te komen worden de differentiaal vergelijkingen gediscretiseerd en, met behulp van allerhande numerieke technieken benaderend opgelost.

De resultaten van een numeriek model kunnen dus alleen die fysische processen reproduceren voor zover ze in het onderliggende *wiskundig model* beschreven zijn en niet beter dan dat ze beschreven zijn. Over veel fysische processen is onze kennis inderdaad nog beperkt of onvolledig (bv. instabiliteiten, vlechten of meanderen van rivieren); anderen zijn zo complex dat ze slechts benaderend, geschematiseerd wiskundig beschreven worden (bv. turbulentie, bodemwrijving, erosie, resuspensie, oevererosie, flocculatie,...). Bovendien kan er een grote kloof zijn tussen de elementaire procesbeschrijving (bv. stroming en zandtransport) en de verschijnselen op macroscopische schaal (bv. morfologisch gedrag van een estuarium of kustzee). Een wiskundig model beschrijft dus de werkelijkheid slechts benaderend.

De *numerieke oplossingen* kunnen bovendien nog verschillen van de juiste wiskundige oplossing door bv. numerieke dispersie, die veroorzaakt wordt door het discretisatieproces waarbij hogere orde termen verwaarloosd worden, wat op hetzelfde neerkomt als het toevoegen van hogere orde termen met een ander teken!. Numerieke oplossingen kunnen bovendien oscillaties vertonen die niets met de realiteit te maken hebben. Het spreekt ook vanzelf dat de oplossingen slechts geldig zijn voor zover de ingegeven data juist zijn en de werkelijkheid voldoende nauwkeurig beschrijven (bv. geschematizeerde geometrie of bathymetrie).

Bovendien vertonen de meeste systemen *niet lineair systeemgedrag* of zelfs een *chaotisch* gedrag (bv. turbulentie). De vraag kan gesteld worden of, zelfs indien het wiskundig/ numeriek model de niet-lineariteit beschrijft of het chaotisch gedrag voorspelt, of het wel om hetzelfde niet-lineair gedrag of chaos gaat ...

Vermits een model geen verschijnselen kan simuleren waarvan de wiskundige beschrijving er niet in opgenomen is of beter dan de geschematizeerde beschrijving toelaat (zo worden bv. alle riooloverstorten in infoworks door één h-Q verband beschreven, terwijl in Vlaanderen geen twee overstorten gelijk zijn en slechts weinigen aan een standaardbeschrijving voldoen) en bovendien t.o.v. de wiskundige modelbeschrijving nog fouten kan toevoegen, kan men zich terecht afvragen of numerieke modellen bruikbaar zijn om nieuwe kennis te genereren.

Er is trouwens juist daarom opnieuw een trend te merken naar het gebruik van meer fysische modellen: daarin is de fysica ten minste juist. In oktober 2003 wordt in Lyon een symposium gehouden over het gebruik van fysische modellen in de XXI^e eeuw.

Toch kunnen numerieke modellen zeer behulpzaam en bruikbaar zijn bij het wetenschappelijk onderzoek, als tenminste aan enkele basisvoorwaarden voldaan is.

Numerieke experimenten

Dat numerieke modellen in tegenstelling met fysische modellen niet door de fysica gecontroleerd worden maar door de ingegeven vergelijkingen en parameters kan ook een voordeel zijn: ze laten toe de natuur te “manipuleren” en te antwoorden op vragen “what if”. Bovendien produceren numerieke modellen, in tegenstelling met veldmetingen resultaten over het ganse domein en niet alleen in enkele punten. Ze zijn ook niet gebonden aan fysische afmetingen en kunnen net zo goed de stroming in de oceanen beschrijven als in een bloedvat of een vloeistofbad waarin chips geproduceerd worden.

Van die eigenschappen kunnen we gebruik maken om numerieke experimenten op te zetten d.i. het numeriek model gebruiken om het effect op de oplossing (stroming, morfologie,...) na te gaan van bepaalde procesbeschrijvingen, parameters, input gegevens, randvoorwaarden, ... Numerieke experimenten produceren meestal snel resultaten en hun gebruik vrij goedkoop zodat veel “experimenten” uitvoeren geen bezwaar is.

Eenmaal men uitgaat van een bepaalde procesbeschrijving kan men bv. nagaan wat het effect is van die onnauwkeurige beschrijving door alternatieven (extreme hypothesen) door te rekenen en na te gaan wat de impact is, men kan belangrijke, relevantie deelprocessen onderscheiden van minder belangrijke
Bv. Turbulentie

Voorwaarden hiervoor zijn:

- Dat de software zeer duidelijk gedocumenteerd is, dat men precies weet wat er in zit en wat niet en hoe het erin zit... Veel commerciële programma's zijn voor een groot deel zwarte dozen. De manuals leggen niet alles uit. Vaak is er ook een verschil tussen “research versies” en “commerciële versies” van software om de eenvoudige reden dat commerciële software in de eerste plaats “robust” moet zijn en de klant zou weinig mogelijk moeilijkheden bezorgen (zodat hij niet vaak de hulplijn moet bellen!). Robuustheid gaat vaak ten koste van nauwkeurigheid. Bovendien is ook rekentijd belangrijk, waardoor (ongemerkt en ongezegd) bepaalde benaderingen doorgevoerd worden. Waar dit in “normale” omstandigheden meestal geen problemen geeft kan dat bij numerieke experimenten met afwijkende waarden problemen geven.
- Complexe software, bv. transportmodellen voor rivieren zijn meestal uiteraard gevoed met info uit sterk verschillende disciplines (hydrodynamica, sedimenttransport, scheikunde, biologie,...). De onderzoeker is meestal slechts monodisciplinair. Het is voor een hydraulicus bv. heel belangrijk dat duidelijk aangegeven wordt waar bv. de vergelijkingen/ parameters die met de afbraak/ omzetting van organisch materiaal te maken hebben vandaan komen zodat hij er een boek kan op naslaan of de hulp van een collega inroepen.
- Bovendien moet de software, om bruikbaar te zijn als wetenschappelijk instrument “open” zijn. De onderzoeker moet kunnen afwijkende vergelijkingen programmeren, verschillende parameterwaarden invoeren.
- De software moet “clean” zijn. Vaak bevatten computerprogramma's verborgen data of (model) parameters (“default” waarden). De wiskunde, de data en de parameters moeten duidelijk gescheiden zijn en onafhankelijk van elkaar kunnen gewijzigd worden.

Verwerven van inzicht

Veel stromingspatronen zijn eigenlijk drie-dimensionaal (al beschrijven we ze vaak nog slechts één of twee dimensionaal). Het *3D- karakter* van de stroming is moeilijk om voor te stellen of in te beelden maar wel essentieel voor het begrijpen van wat er gebeurt (bv. Stroming in rivierbochten, over zandbanken,...). Numerieke modellen kunnen ons 3D resultaten geven en ze bovendien op allerlei “fancy” manieren voorstellen. Dit geeft ons heel wat beter inzicht dan bv. aan de hand van meestal een beperkt aantal (punt) metingen mogelijk is.

De meeste verschijnselen zijn veranderlijk in de tijd (wassen, estuaria, kustzones,...). Het is voor de meesten van ons moeilijk om te denken in termen van “*dynamica*”, gewend als we zijn aan de statica en van om te gaan met “permanente” of “stationaire” stromingen. Numerieke modellen laten toe het dynamisch gedrag niet alleen te berekenen maar ook te visualiseren met bewegende beelden en animatie. Zo krijgen we bv. bewegende stroomlijnen en evoluerende “bodems”, met het getij veranderende concentraties etc. te zien.

Sommige verschijnselen, zoals translatiegolven in rioleringen die kortstondig in één opwaarts knooppunt een drukpiek doen ontstaan werden vaak afgedaan als “outliers” of “fouten” van het model. Als men de dynamica begrijpt dan ziet men dat dit helemaal niet het geval is maar een essentieel element van het systeemgedrag.

Parameterizeren

Veel hydrodynamische processen zijn bijzonder complex en ingewikkeld. Veel te ingewikkeld om een wiskundige detail modellering te gebruiken in operationele modellen (rekentijd?, hoeveelheid data,...). Dan kan men aan de resultaten van simulaties met een “wetenschappelijk” of “onderzoeks” model dat het fenomeen in detail beschrijft (bv. flocculatie van slib, entrainment van slib,...) eenvoudiger vergelijkingen “fitten” die slechts enkele parameters bevatten en de fysica veel beter beschrijven dan eerder gebruikte “empirische” formules. Deze vergelijkingen worden dan ingebouwd in de operationele modellen (BV. COSINUS, ...)

Onderzoek naar het gedrag van modellen zelf

Numerieke modellen kunnen zelf het onderwerp uitmaken van onderzoek. De voortplanting van onzekerheden op de data, modelbeschrijving zelf en de modelparameters is bijzonder belangrijk, zeker bij complexe, gekoppelde of geïntegreerde modellen.

In sommige gevallen leert de analyse dat het ogenschijnlijk ondubbelzinnige cijferresultaat net zo goed of zo slecht de werkelijkheid beschrijft als een toevalsgetallen generator... In die omstandigheden kunnen we ons de moeite van het modelleren wel besparen.

Ook dit is kennis opdoen. Voor de modelleur is het inderdaad van het allergrootste belang goed te kunnen inschatten wat de waarde is van de verkregen cijfers.